



TITLE:

新規な結合様式を持つ高周期典型 元素化合物の性質解明

AUTHOR(S):

鈴木, 裕子

CITATION:

鈴木, 裕子. 新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の性質解明. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書
2018, 2017: 31-31

ISSUE DATE:

2018-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/230731>

RIGHT:

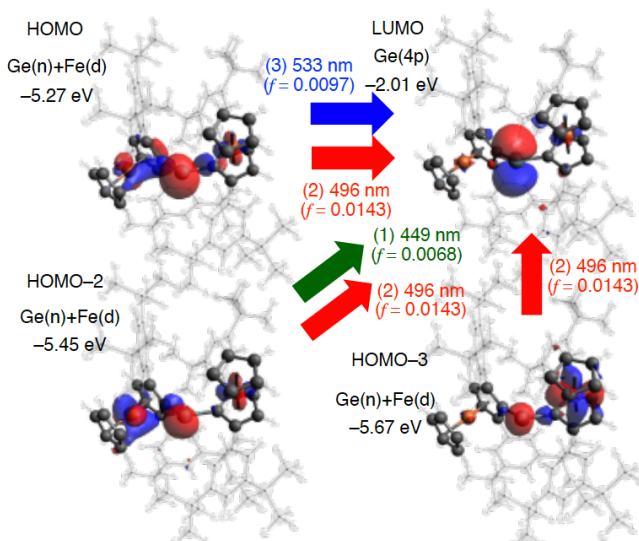
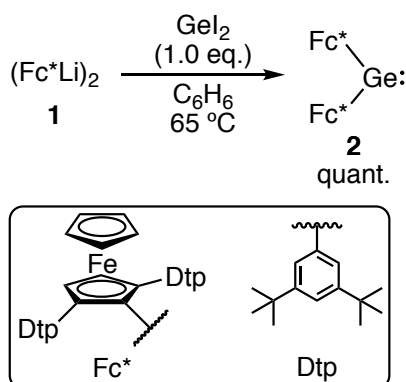
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の性質解明

Theoretical Studies on the Properties of Novel Main Group Element Compounds

京都大学化学研究所 物質創製化学研究系有機元素化学研究領域 鈴木 裕子

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムにおいて、Gaussian 09 プログラムによる量子化学計算により、高周期14族元素であるゲルマニウムの二価化学種(ゲルミレン)の性質を明らかにした。一般にゲルマニウム二価化学種、ゲルミレンは特に 4p 被占有軌道の高い求電子性に由来した高い反応性を示す。ゲルミレンを安定な化合物として合成・単離するためには、自己多量化を防ぐ立体保護基の導入が必要不可欠である。今回我々は、溶液中でも二量化しない安定なゲルミレンとして、立体保護と酸化還元状態の安定化を目的としてかさ高いフェロセニル基の導入を考え、かさ高いビス(フェロセニル)ゲルミレン(**2**)の合成・単離を目的として検討を行った。単離した(Fc^*Li)₂と GeI_2 の反応により Fc^*_2Ge (**2**) を合成・単離することに成功し、X 線結晶構造解析により構造を明らかにした。ゲルミレン **2** は UV/vis スペクトルにおいて、約 405 nm および 475 nm に二つの特徴的な吸収をしめし、THF 中とトルエン中のスペクトルで顕著な変化は見られなかった。そこで、吸収の由来となる電子遷移を知る目的で、Gaussian 09 プログラムを用い、TDDFT 計算を行った。計算レベルは、TD-B3PW91/6-311G(C, H); 6-311G(3d)(Fe, Ge)を用いた。その結果、これらの遷移は、n-p 遷移、d-p 遷移が混じった吸収であることがわかり、弱い n-p 遷移は比較的大きな d-p 遷移と吸収が重なっているために顕著な溶媒効果が観測されなかったことが判った。



発表論文(謝辞あり): Suzuki, Y.; Sasamori, T.; Guo, J.-D.; Tokitoh, N. *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 364.

発表論文(謝辞なし): 特になし